عنوان پایاننامه

تجزیه و تحلیل آند باتری های لیتیم یونی مبتنی بر مواد دو بعدی

چکیده پایان نامه

توسعه سریع محصولات الکترونیکی دانشمندان را به طراحی و کشف مواد جدید برای الکترود باتری های لیتیم یونی ملزم کرده است که از قابلیت شارژ / دشارژ فوق العاده بالا برخوردار باشند، به همین دلیل توجه به مواد دوبعدی از جمله نانوساختار گرافن(Graphene) و مولیبدن دی سولفاید (MoS_2) الهام گرفته از این موضوع می باشد. مطالعات جدید بر روی بوروفن نشان می دهد که نمونه جالب توجهی برای دستیابی به این هدف است. در این پایان نامه خواص شیمیایی و الکتریکی سه فاز بوروفن (b_{12} ،striped و c_3) با استفاده از نظریه تابع چگالی(DFT) و دینامیک مولکولی مورد بررسی دقیق قرار گرفته است. براساس نتایج بدست آمده، بوروفن می تواند گزینه ی بسیار مناسبی به عنوان الکترود برای باتری های لیتیم یونی باشد. نتایج صورت گرفته در سه فاز مختلف بورفن نشان می دهد بهینه سازی محل های جذب لیتیم هدایت مناسبی قبل و بعد از جذب دارد. ظرفیت ویژه فازهای b_{12} ،Striped و c_3 به ترتیب ۱۸٦٤، ۱۹۸٤ و ۱٤۳۸ $mAhg^{-1}$ محاسبه شده است که نشان می دهد ظرفیت بالایی به نسبت دیگر مواد دوبعدی دارد.، همچنین سد انتشار(Diffusion barrier) بسیار کوچکی(۹ meV) در راستای حالت خاصی از انتشار برای فاز Striped در مقابل خود می‌بیند که این باعث می شود سرعت انتشاری به مراتب بالاتر از حالتی

که سطح، گرافن(10^5برابر) یا MoS_2 10^4)برابر) باشد به خود بگیرد. به دلیل ظرفیت بسیار بالا و همچنین خواص فلزی مناسب بوروفن این نتیجه را می رساند که می توان به عنوان ماده‌ی الکترود آند مورد استفاده قرار گیرد.

کلمات کلیدی

باتری لیتیم یونی، مواد دو بعدی، بروفن، سد انتشار، نظریه تابع چگالی

کلمات کلیدی انگلیسی

Two-dimensional material, Borophene, Density Functional Theory, Diffusion barrier, DFT